

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Jan Dvořák

Název práce: Associative electron detachment in collision of negative anion

Studijní program a obor: Fyzika, Teoretická fyzika

Rok odevzdání: 2017

Jméno a tituly oponenta: prof. J. Horáček, DrSc.

Pracoviště: UTF MFF UK

Kontaktní e-mail: jiho@matfyz.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

Tato práce je věnována procesu odtržení elektronu při srážce aniontu H a Li s neutrálním atomem H resp. Li. Tento proces má velkou důležitost v raných stádiích Vesmíru a může výrazně přispívat ke tvorbě modelů popisujících tato stadia. (Litium bylo vytvořeno již při velkém třesku a podílelo se na vzniku vůbec prvních molekul ve Vesmíru.)

Pokud je mi známo, nebyly tyto procesy ještě nikdy detailně studovány. Proces odtržení elektronu od aniontu je zde studován v rámci nelokálního rezonančního modelu, což je nejdokonalejší (a také nejobtížnější) současný model popisující tento proces. Další komplikací je též ten fakt, že molekula LiH na nadkritický dipólový model. To je zřejmě jeden z důvodů, proč tento systém byl tak málo studován i když je velice důležitý. V práci bylo navrženo několik modelů procesu asociativního odtržení, které jsou všechny v souladu s dostupnými daty i když se jejich výsledky navzájem poněkud liší. To ukazuje na fakt, že pro vytvoření správného nelokálního rezonančního modelu je třeba získat přesná data zejména v okolí křížení potenciálních křivek. Tato data nejsou v současné době k dispozici a jejich získání by mohlo být dobrým tématem pro pokračování v této práci.

Tuto diplomovou práci hodnotím jako výrazně nadprůměrnou a myslím, že představuje dobrý základ pro doktorskou disertační práci. Výstupy z této práce výrazně zpřesňují parametry (zejména rate constants) dosud používané v modelování raných fází Vesmíru a budou jistě použity v budoucí práci.

V předložené práci J. Dvořák prokázal schopnost zvládat rozsáhlé oblasti jak z kvantové teorie, tak i z numerické matematiky. Prokázal schopnost samostatné tvůrčí vědecké práce. Doporučuji proto práci přijmout jako práci diplomovou.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. Použití SVD rozkladu je velice zajímavá idea, její efektivita ale asi bude záviset na tom, jak rychle budou diagonální členy klesat. SVD je vhodné zejména pro téměř singulární matice. Proč je použití SVD vhodné zde?
2. Ocenil bych podrobnější srovnání získaných výsledků s prací Ph. Stancila.
3. Jaký je důvod extrémního růstu velikosti parametrů polynomu (4.1)? Diskutovali jste i jiné tvary funkce p ?

Práci

- doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako diplomovou

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:
Praha, 22. srpna 2017